

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Potensi *carbon nanotube* untuk berbagai aplikasi menyebabkan penelitian *carbon nanotube* terus dilakukan. Beberapa potensi aplikasi *carbon nanotube* antara lain sebagai elektroda, material komposit, transistor, pendeteksi gas, dan penyimpan hidrogen. *Carbon nanotube* (CNT) banyak diaplikasikan dalam bidang *fuel cell*, *biomedical* dan area lingkungan karena mempunyai sifat elektronik, dan sifat adsorpsi yang bagus, serta sifat fisika dan kimia yang stabil¹⁻⁵.

Carbon nanotube selain merupakan material yang memiliki banyak keunggulan dibandingkan material lain juga memiliki ukuran yang sangat kecil sehingga sangat efektif dan efisien untuk digunakan. *Carbon nanotubes* (CNT) merupakan material baru memiliki kelebihan untuk dibuat elektroda, di antaranya resistivitas rendah, konduktivitasnya tinggi, dan kestabilan yang tinggi⁶. Selain itu karena strukturnya yang berongga dan sifat transfer muatannya yang baik maka *carbon nanotube* sangat baik digunakan untuk bahan penyerap dan elektroda pada peralatan elektronik⁷.

Perubahan sifat elektronik dari *carbon nanotube* dapat disebabkan oleh beberapa hal, salah satunya yaitu akibat adanya adsorpsi atom atau molekul. Adsorpsi atom atau molekul pada *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) secara teoritis dan eksperimental telah banyak dilakukan, dimana hasilnya menunjukkan bahwa proses adsorpsi ini berpengaruh terhadap sifat elektronik SWCNT⁸. Beberapa penelitian melaporkan secara teoritis dan komputasi, Ashrafi *et al* menginvestigasi pengaruh adsorpsi nitrogen (N) pada dinding *carbon nanotube* mengubah sifat elektroniknya⁹. Wei Li *et al* juga menginvestigasi pengaruh adsorpsi molekul SO₂ pada dinding *carbon nanotube* yang didoping atom Ni juga mengubah daya adsorpsi dan sifat konduktivitas listrik *carbon nanotube*¹⁰. Selain itu juga ada Gowri Sangkar *et al* yang menginvestigasi sifat

elektronik dari adsorpsi atom boron (B) dan silikon (Si) pada dinding *carbon nanotube*¹¹.

Atom litium adalah suatu atom yang mempunyai 3 buah elektron pada kulitnya, sifat terpenting litium diantaranya adalah kapasitas kalor tinggi, interval suhu besar, reaktif, konduktivitas termik dan listrik tinggi, dan kepadatan yang sangat rendah. Litium digunakan dalam berbagai aplikasi, salah satu yang paling umum yaitu baterai litium. Aplikasi utama lainnya adalah dalam pembuatan keramik dan kaca, pelumas, bahan pesawat, dan obat anti depresi¹². Litium sangat reaktif dan terkorosi dengan cepat dan menjadi hitam di udara lembab, oleh karena itu logam litium biasanya disimpan dengan dilapisi minyak¹³.

Beberapa penelusuran literatur yang telah dilakukan, penelitian mengenai adsorpsi atom pada ujung terbuka SWCNT telah banyak dilakukan. Akan tetapi, adsorpsi atom pada dinding SWCNT dengan diameter *zigzag* (8.0) dan *armchair* (4.4)) masih jarang ditemukan dan diketahui *carbon nanotube* memiliki reaktivitas yang berbeda pada bagian dinding dan ujung terbukanya¹⁴. Salah satu metode kimia komputasi yang sering digunakan adalah metode semiempiris Austin Model 1 (AM1). Metode ini memiliki ketepatan prediksi yang lebih baik, tidak memerlukan memori yang besar dan waktu yang relatif cepat dalam proses perhitungannya¹⁵.

Berdasarkan latar belakang di atas, maka dapat diambil fokus permasalahan yaitu Atom Litium yang diadsorpsi Pada Dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0) Menggunakan Metode Semiempiris AM1. Penelitian ini diharapkan dapat mengetahui bagaimana pengaruh interaksi atom Li terhadap celah energi, energi adsorpsi, energi ikatan SWCNT dan adsorpsi litium pada dinding SWCNT menggunakan metode AM1

1.2. Perumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, maka yang menjadi permasalahan dalam penelitian ini adalah :

1. Bagaimana adsorpsi/interaksi atom litium pada dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCT) (8.0).
2. Bagaimana pengaruh adsorpsi atom litium terhadap celah energi (ΔE), energi ikatan (BE), energi adsorpsi dari SWCNT (8.0)

1.3 Tujuan

Tujuan dari penelitian ini adalah :

1. Menentukan adsorpsi/interaksi antara atom litium dengan dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0).
2. Mengetahui pengaruh adsorpsi atom litium terhadap celah energi (ΔE), energi ikatan (BE), energi adsorpsi dari SWCNT (8.0).

1.4 Manfaat Penelitian

Adapun manfaat penelitian ini adalah :

1. Memberikan informasi bagaimana adsorpsi/interaksi litium pada dinding *Single Walled Carbon Nanotube* (SWCNT) (8.0).
2. Mengetahui pengaruh adsorpsi atom litium terhadap celah energi (ΔE), energi ikatan (BE), energi adsorpsi dari SWCNT (8.0).

